

В работе изучены влияния различных способов и условий пробоподготовки на метрологические характеристики результатов измерений (термического режима озоления растительных проб, влияние ультразвукового воздействия на полноту извлечения элементов), сделана адаптация методики определения элементов в почвах для электротермического способа атомизации и к диапазону достоверно определяемых концентраций на приборе «Спираль-17».

## СРАВНЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ВАЛОВОГО СОДЕРЖАНИЯ УГЛЕВОДОРОДОВ

*Захарова И.С., Мясникова Л.П., Волкова С.С., Кудрявцев А.А.*

ГОУ ВПО Тюменский государственный университет

Задача количественного определения валового содержания углеводородов (УВ) при анализе группового состава проб сложного состава и экологических исследованиях нефтяных загрязнений представляется простой лишь при поверхностном рассмотрении. Для ее решения в настоящее время существует ряд спектроскопических методов, заключающихся в измерении:

- интенсивности поглощения в ИК-спектре при фиксированных волновых числах, соответствующих характеристическим колебаниям углеводородного скелета;
- суммарного поглощения в диапазоне  $3050\text{--}2850\text{ см}^{-1}$  – на ИК-анализаторах нефтепродуктов и концентратомерах АН, КН, «Эврика» и им аналогичных;
- поглощения в УФ-спектре при  $\lambda = 270\text{ нм}$  и интенсивности люминесценции.

Достоинства и недостатки этих подходов детально проанализированы в настоящей работе.

Появление компьютеризированных спектральных приборов и совершенствование математического обеспечения позволило существенно расширить аналитические возможности спектральной техники. Одним из удачных приложений явилось использование интегральных характеристик полос спектра, менее чувствительных к аппаратным погрешностям измерений. Более того, при исследовании группового состава проб, когда следует абстрагироваться от особенностей контура спектра молекул индивидуальных веществ, интегральная интенсивность спектра в диапазоне частот, свойственных одному типу молекулярного осциллятора, является объективной характеристикой веществ-гомологов. Для определения валового содержания УВ методом ИК-спектроскопии используется диапазон  $3200\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ , соответствующий валентным колебани-

ям группы C-H, а также 3200-3000 и 3000-2800  $\text{см}^{-1}$  для отдельного измерения содержания ароматических и насыщенных УВ, соответственно (Патент RU 2117933 C1).

Широкое внедрение в практику спектральных измерений Фурье-спектрометров, сопряженных с ПЭВМ и обладающих многими преимуществами перед классическими монохроматорными приборами, значительно облегчает аналитическое использование цифровых методов спектроскопии. В работе сделано сравнение воспроизводимости результатов измерений содержания УВ в модельных растворах 27 веществ и их смесей, а также при определении валового содержания насыщенных и ароматических углеводородов в экстрактах нефтяных загрязнений почв. Для сравнительного исследования использованы данные, полученные на двухлучевом классическом ИК-спектрофотометре Specord M80, Фурье-спектрометрах Avatar 330, ФСМ 1201, также концентратометре АН-2. Результаты определения групповых коэффициентов УВ хорошо согласуются между собой, однако метрологические характеристики, найденные с использованием Фурье-спектрометров, существенно лучше.